

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**Аннотированная рабочая программа дисциплины
Спектроскопические методы**

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Магистерская программа
**Химические и физические методы исследований в экологической и
криминалистической экспертизе**

Квалификация
Магистр

Форма обучения
Очная

Томск – 2016

1. Код и наименование дисциплины: Б1.В.ДВ.3.1 «Спектроскопические методы»

2. Цель изучения дисциплины – формирование у будущих экспертов знаний спектроскопических методов анализа, особенностей объектов экспертизы, характера решаемых вопросов, а также умения применять эти методы для выявления тех или иных признаков исследуемых объектов.

3. Год/годы и семестр/семестры обучения: 1 год обучения, 1 семестр.

4. Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы, 144 часа, из которых 42 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (14 часов – занятия лекционного типа, 28 часов – лабораторные работы) 66 часов – самостоятельная работа обучающегося, 36 часов составляет подготовка к экзамену.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (заполняется в соответствии с картами компетенций)

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
Первый уровень (пороговый) (ОПК-2)-I – владением современными компьютерными технологиями при планировании исследовании, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации	З (ОПК-2)-I Знать: теоретические основы современных информационных технологий У2 (ОПК-2)-I Уметь: выполнять стандартные и специфические операции при получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации.
Второй уровень (углубленный) (ОПК-3) – II -способность реализовать нормы техники безопасности в лабораторных и технологических условиях.	В (ОПК-3)-II Владеть: навыками и способностью проведения химического эксперимента с соблюдением норм техники безопасности в лабораторных и технологических условиях.
Первый уровень (пороговый) (ПК-1) – I -способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты.	У (ПК-1) – I – Уметь: самостоятельно планировать исследования и получать новые научные и прикладные результаты
Первый уровень (пороговый) (ПК-2) – I –владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии.	З (ПК-2) – I – Знать: теоретические основы спектроскопических методов исследования веществ. В (ПК-2) – I – Владеть: навыками криминалистического исследования реальных объектов методами атомной и молекулярной спектроскопии.
Первый уровень (пороговый) (ПК-3) – I готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований.	У (ПК-3) – I Уметь: использовать современное спектроскопическое оборудование для криминалистической экспертизы.

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

Наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)			Самостоятельная работа (час.), в том числе	
		Лекции	Лабораторные занятия	Защита ИЗ	СРС	Консультации
Введение. Классификация методов. Аппаратура для оптической спектроскопии.	4	2	–		2	
Молекулярная абсорбционная спектроскопия в УФ и видимой области, теоретические основы метода и его применение для выявления конкретных признаков исследуемых объектов	10	2	–		8	
Сущность и теоретические основы люминесцентного метода анализа. Его применение для криминалистического исследования материалов, веществ и изделий.	12	2	–		8	2
Сущность, теоретические основы и возможности метода атомно-эмиссионной спектроскопии	8	2	–		6	
Сущность, теоретические основы и возможности метода атомно-абсорбционной спектрометрии	10	2	–		6	2
Сущность, теоретические основы и возможности атомно-флуоресцентного анализа	8	2	–		6	
Сущность, теоретические основы и возможности рентгенофлуоресцентного анализа	10	2	–		6	2
Особенности объектов экспертизы (стекло, почвы, растительные образцы, лакокрасочные материалы, товарные нефтепродукты, следы металлизации, металлы и сплавы), характер решаемых экспертом вопросов	46	–	24	4	12	6
Промежуточный контроль (подготовка к экзамену)	36					
Итого	144	14	28		66	

6.2. Содержание дисциплины «Спектроскопические методы»

1. Введение.

Электромагнитное излучение, его виды, взаимодействие с веществом. Классификация спектроскопических методов анализа. Природа сплошного полосатого и линейчатого спектров. Аппаратура для оптической спектроскопии: источники излучения, монохроматоры, их дисперсия и разрешающая способность, Приемники излучения, оптические материалы.

2. Методы молекулярной спектроскопии.

Молекулярная абсорбционная спектроскопия в УФ и видимой области. Электронные переходы в молекуле с участием σ -, π - и n -электронов, электронные переходы с переносом заряда, $d-d$ и $f-f$ переходы. Общая характеристика метода, его возможности. Основной закон поглощения электромагнитного излучения. Причины отклонения от закона Бугера-Ламберта-Бера. Физико-химические условия образования фотометрируемых форм. Аппаратура и техника измерения величин, характеризующих светопоглощение. Методы количественного анализа. Особенности фотометрического определения органических соединений. Отражательная спектроскопия. Зеркальное и диффузное отражение. Применение методов для криминалистического исследования различных объектов.

Люминесцентный анализ. Понятие и виды люминесценции. Механизмы возникновения флуоресценции и фосфоресценции. Основные закономерности молекулярной люминесценции (закон Стокса-Ломмеля, правила Каши и Левшина). Выход люминесценции, закон Вавилова. Тушение люминесценции: концентрационное, температурное, посторонними веществами. Способы повышения селективности без процедуры разделения. Аппаратура, техника получения и фотографирования видимой люминесценции. Примеры практического применения метода в судебно-медицинской экспертизе, в исследовании вещественных доказательств на наличие биосубстратов, хлорофилла, смазочных материалов, невидимых глазом надписей, примесей, не характерных для данного объекта, для дифференциации стекол, резин, каучуков и других материалов.

3. Методы атомной спектроскопии.

Метод атомно-эмиссионной спектроскопии (АЭС). Линейчатая структура атомных спектров, связь характера спектра со строением электронных оболочек атома. Интенсивность атомных спектральных линий, зависимость от температуры, концентрации (самопоглощение, самообращение) и энергии возбуждения. Основы количественного анализа, уравнение Ломакина-Шайбе. Источники возбуждения эмиссионных спектров: электротермические (дуга, искра), плазменные, полый катод, лазер. Лазерный пробоотбор с дополнительным возбуждением факела поперечным искровым разрядом. Лазерный микроспектральный анализ. Аппаратура и техника регистрации эмиссионных спектров с помощью многоканального анализатора (массив фотодиодов на кремниевых кристаллах). Программный комплекс «Атом». Проведение качественного и количественного спектрального анализа. Задачи, решаемые с применением метода АЭС. Подготовка исследуемой пробы к анализу в зависимости от решаемой задачи.

Метод атомно-абсорбционной спектрометрии (ААС). Условия поглощения излучения свободными атомами в газовой фазе, основной закон светопоглощения. Оптическая плотность и пропускание, их связь. Основные узлы атомно-абсорбционной установки. Источники атомизации и возбуждения. Техника измерения на атомно-абсорбционном спектрометре SOLAAR. Задачи, решаемые с применением метода ААС.

Атомно-флуоресцентный анализ (АФА). Понятие, основные закономерности и спектр атомной флуоресценции. Зависимость интенсивности флуоресценции от интенсивности возбуждающего источника света. Источники атомизации и возбуждения. Лазерный

атомно-флуоресцентный анализ. Применение метода АФА.

Рентгенофлуоресцентный анализ (РФА). Механизм электронного возбуждения в рентгеновской спектроскопии, особенности рентгеновского спектра. Устройство рентгеновского спектрометра. Источник излучения (рентгеновская трубка), диспергирующее устройство (кристалл-анализатор), детекторы (газовый ионизационный, сцинтилляционный, полупроводниковый). Рентгенофлуоресцентный спектрометр с энергетической дисперсией. Практическое применение метода РФА.

4. Криминалистическое исследование материалов, веществ, изделий.

Криминалистическое исследование стекла. Типы стекол и стеклообразующих материалов. Комплексный характер исследования. Химический состав стекол, родовые, групповые признаки и признаки узкой групповой принадлежности. Отбор проб и подготовка к анализу методом АЭС, интерпретация результатов.

Криминалистическое исследование сложных многокомпонентных систем (почвы, растительные образцы, лакокрасочные материалы, лакокрасочные покрытия, товарные нефтепродукты и т.д.). Комплексный характер исследования. Элементный состав неорганической части объектов. Отбор проб и подготовка к анализу спектроскопическими методами.

Исследование следов металлизации. Экспертиза огнестрельных повреждений (правила отбора проб, методики установления факта выстрела, вида снаряда, дифференциации входного и выходного отверстий, определения дистанции выстрела, обнаружения продуктов выстрела на руке стрелявшего. Экспертиза повреждений колюще-режущими орудиями, анализ электрометки.

Исследование изделий из металлов. Основные задачи экспертизы, объекты исследования. Экспертиза легкоплавких металлов и сплавов, чугунов и сталей, цветных и благородных металлов. Исследование металлических покрытий.

6.3. Форма промежуточной аттестации: экзамен.

7. Ресурсное обеспечение дисциплины «Спектроскопические методы»

7.1. Основная литература

1. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. [Ч. 1] / М.А. Ельяшевич. М.: ЛИБРОКОМ, 2012. – 236 с.
2. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. [Ч. 2] / М.А. Ельяшевич. М.: ЛИБРОКОМ, 2012. – 415 с.
3. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. [Ч. 3] / М.А. Ельяшевич. М.: ЛИБРОКОМ, 2012. – 527 с.
4. Васильева В.И. Спектральные методы анализа: практическое руководство / В.И. Васильева, О.Ф. Стоянова, И.В. Шкутина и др.; под ред. В.Ф. Селеменова, В.Н. Семенова. Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2014. – 412 с.
5. Ганеев А.А. Атомно-абсорбционный анализ: учебное пособие / А.А. Ганеев, С.Е. Шолупов, А.А. Пупышев и др. Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2011. – 303 с.
6. Беккер Ю. Спектроскопия / Ю. Беккер. – М.: Техносфера, 2009. – 528 с.
7. Пентин Ю.А. Основы молекулярной спектроскопии / Ю.А. Пентин, Г.М. Курамшина. М.: Лаборатория знаний, 2008. – 398 с.

7.2. Дополнительная литература

1. Алов Н.В. Аналитическая химия и физико-химические методы анализа Т. 2: в 2-х томах /Н.В. Алов, И.А. Василенко, Б.А. Гольдштрах [и др.]; под ред. А.А. Ищенко. М.: Академия, 2010. – 411 с.
2. Кристиан Г. Аналитическая химия. Т. 2: в 2-х т. /Г. Кристиан; пер. с англ. А.В. Гармаша [и др.]. Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. – 504 с.

3. Скворцов Л.А. Лазерные методы дистанционного обнаружения химических соединений на поверхности тел / Л.А. Скворцов. М.: Техносфера, 2015. – 207 с.
4. Марченко З. Методы спектрофотометрии в УФ и видимой областях в неорганическом анализе. / З. Марченко, М. Бальцежак; Пер. с польск. – М: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007. – 711 с.
5. Дробышев А.Н. Основы атомного спектрального анализа. – СПб: Изд-во СПб ун-та, 2000.
6. Пупышев А.А., Суриков В.Т. Масс-спектрометрия с индукционно-связанной плазмой. Образование ионов. – Екатеринбург: УрО РАН, 2006.
7. Митричев В.С. Криминалистическая экспертиза материалов, веществ и изделий / В.С. Митричев. Саратов: Изд-во Саратовского университета, 1980. – 113 с.
8. Русаков Н.М. Криминалистическое исследование оружия и следов его применения / Н.М. Русаков. Омск: Омская высшая школа милиции, 1981. – 116 с.
9. Маланьина Н.И. Криминалистическое исследование стекла / Н.И. Маланьина. Саратов: Изд-во Саратовского ун-та, 1984. – 118 с.
10. Основы криминалистической экспертизы материалов, веществ и изделий / Под ред. В.Г. Савенко. М.: МВД РФ Экспертно-криминалистический центр. 1993. – 207 с.
11. Моисеева Т.Ф. Комплексное криминалистическое исследование потожировых следов человека / Т.Ф. Моисеева; Науч. ред. Н.П. Майлис. М.: Городец-издат, 2000. – 222 с.
12. Парамонова Л.Ф. Криминалистическая экспертиза специальных химических веществ / Л.Ф. Парамонова. М.: Юрлитинформ, 2013. 268 с.

7.3. Интернет-ресурсы и программное обеспечение

1. Ганеев А.А. Атомно-абсорбционный анализ: учебное пособие / А.А. Ганеев, С.Е. Шолупов, А.А. Пупышев и др. Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2011, 303 с. Издательство «Лань» [Электронный ресурс]: электрон.-библиотечная система. – Электрон. дан. – СПб. 2010- . – URL: <http://e.lanbook.com/>
2. Шелковников В.В. Физико-химические методы анализа: учебно-методический комплекс /В.В. Шелковников, В.И. Отмахов, Е.В. Петрова [и др.]; Том. гос. ун-т, [Ин-т дистанционного образования]. – Томск: [ИДО ТГУ], 2011. URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/vtls:000423798>
3. Отмахов В.И., Петрова Е.В. Метод дуговой атомной спектрометрии с многоканальным анализатором эмиссионных спектров (Учебно-методическое пособие). Томск: РИО ТГУ. 2014. 75 с. <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/vtls:000469531>
4. Пупышев А.А. Пламенный и электротермический атомно-абсорбционный анализ с использованием спектрометра AAnalyst 800. Учебное электронное текстовое издание. Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2008. [Электронный ресурс](#)

7.4. Учебно-методические пособия кафедры

1. Отмахов В.И., Петрова Е.В., Киселева М.А. Спектроскопические методы анализа. Учебное пособие. Томск: РИО ТГУ, 2010. – 149 с.
2. Киселева М.А. Аналитическая химия. Химический анализ реальных объектов / М. А. Киселева, [и др.]. – Томск: РИО ТГУ, 2012, 91 с.

8. Автор: Петрова Елена Васильевна, канд. хим. наук, доцент кафедры аналитической химии ХФ ТГУ.